

## Моделирование ионного воздействия на металлические системы

**Созонова Наталья Михайловна**

**Дроздов Александр Юрьевич**

**Физико-технический институт Уральского отделения РАН**

*Баянкин Владимир Яковлевич, д.т.н.*

[Kingdom88@mail.ru](mailto:Kingdom88@mail.ru)

Ионная имплантация широко применяется в различных областях науки как метод модифицирования механических свойств поверхностного слоя твердого тела, но некоторые вопросы до сих пор остаются малоизученными. Актуальными остаются исследования образования и накопления радиационных дефектов, поведения внедренных атомов, эффекта поверхностной сегрегации и влияние короткоживущих некогерентных источников упругих волн. Их изучение является трудной задачей, поскольку при комнатной температуре часть радиационных дефектов отжигается и физическое состояние материала во время и после облучения отличаются. Поэтому наибольший интерес представляют результаты, полученные непосредственно во время ионной имплантации и сразу после ее окончания. Это возможно с помощью компьютерного моделирования ионной имплантации.

Моделирование выполняется с использованием программного пакета LAMMPS [1] и потенциалов погруженного атома (embedded atom method potential) [2, 3] для систем на основе железа. Данное семейство потенциалов позволяет в рамках классической МД точнее описывать характер взаимодействия, свойства и структуру металлов и сплавов по сравнению с парными межатомными потенциалами. При этом обеспечивается хорошее количественное согласие с широким набором экспериментальных данных и первопринципных расчетов, включая постоянную решетки для различных температур, модули упругости, энергии точечных дефектов, температуру плавления, энергию ОЦК-ГЦК перехода, плотность и структурный фактор жидкой фазы. Шаг по времени подбирался для различных энергий ионной имплантации и составлял 10-18 с.

В данной работе с помощью программного пакета LAMMPS создавалась система Fe+Ni, содержащая не более 50000 атомов. Облучение проводилось ионом Ag с энергиями облучения 10-30 кэВ. Далее проводилась стабилизация системы путем релаксации при комнатной температуре. Для анализа исследуемой структуры были построены функции радиального распределения в разные моменты времени. При изучении которых выявлено, что структура решетки изменяется. В результате моделирования было обнаружено, что происходит образование дефектов в структуре моделируемого образца. На границе раздела решетки Ni и решетки Fe происходит образование пор при облучении ионом Ag с энергией 10кэВ, чего не наблюдается при облучении ионом Ag с энергиями 20 кэВ и 30кэВ. Выявлено, что на границе двух металлов формируется переходный слой. Предложенная компьютерная модель является тестовой системой для исследования основных закономерностей формирования структурных неоднородностей в биметаллических образцах.

Список публикаций:

[1] URL: LAMMPS WWW Site: <http://lammps.sandia.gov/>

[2] Daw M. S., Baskes M. I. // *Phys. Rev. B*. 1984. V. 29. № 12. P. 6443-6453.

[3] Daw M. S., Baskes M. I. // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 50. P. 1285.

## Оптические и магнитооптические спектры и электронная структура монокристалла

**ErAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>**

**Соколов Валерий Владимирович**

*Малаховский Александр Валентинович, Гудим Ирина Анатольевна*

**Институт физики имени Л.В. Киренского КНЦ СО РАН**

*Малаховский Александр Валентинович, д.ф.-м.н.*

[valer963@iph.krasn.ru](mailto:valer963@iph.krasn.ru)

Er<sup>3+</sup> - это широко распространенный активный ион используемый в твердотельных лазерах. В частности, генерация лазера была получена в кристалле YAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> с примесью Er. Аллюобораты RAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (R - Y или редкоземельный (РЗ) металл) имеют структуру хантита с тригональной пространственной группой R32 (*D*<sub>3</sub><sup>2</sup>) в высокотемпературной фазе. Среда с высокой концентрацией активных ионов редкоземельных элементов необходима для миниатюрных твердотельных лазеров. Редкоземельные аллюобораты со структурой хантита являются идеальным материалом для этих целей, так как эта структура позволяет вводить РЗ ионы с высокой концентрацией вплоть до стехиометрического состава.

Линейно поляризованные ( $\pi$  и  $\sigma$ ) спектры поглощения и магнитного кругового дихроизма (МКД) кристалла ErAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> были измерены при  $T = 90$  К для 11 полос поглощения:  $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$ ,  $^4I_{9/2}$ ,  $^4F_{9/2}$ ,  $^4S_{3/2}$ ,  $^2H_{11/2}$ ,

$^4F_{7/2}$ ,  $^4F_{5/2}$ ,  $^4F_{3/2}$ ,  $^2G_{9/2}$ ,  $^4G_{11/2}$ ,  $^4G_{9/2}+^2K_{15/2}+^2G_{7/2}$ . Для анализа спектров были использованы два подхода: 1) с помощью неприводимых представлений локальной точечной группы ( $D_3$  в нашем случае) и 2) в приближении волновых функций  $|J, \pm M_J\rangle$  свободного атома, что возможно в кристаллах с осевой симметрией.

1. Первый подход основан на правилах отбора для  $\pi$  и  $\sigma$  поляризаций:

	$E_{1/2}$	$E_{3/2}$
$E_{1/2}$	$\pi, \sigma(a)$	$\sigma(a)$
$E_{3/2}$	$\sigma(a)$	$\pi$

На основании экспериментально определённых поляризаций переходов и правил отбора были идентифицированы компоненты расщепления основного и возбуждённых состояний в кристаллическом поле. Проблема идентификации переходов и состояний из спектров при  $T = 90$  К затруднена, так как ряд уровней основного мультиплетта заселяется, и наблюдаются переходы из этих уровней. Тем не менее, эти переходы позволяют найти позиции и симметрии состояний основного мультиплетта: 0 ( $E_{1/2}$ ), 46 ( $E_{3/2}$ ), 104 ( $E_{1/2}$ ), 122 ( $E_{3/2}$ ), 160 ( $E_{3/2}$ ), 233 ( $E_{1/2}$ ), 263 ( $E_{1/2}$ ), 293 ( $E_{1/2}$ )  $\text{cm}^{-1}$ . Следует отметить, что энергии уровней основного мультиплетта, полученные из разных переходов существенно различны. Это означает, что электронный переход влияет на локальные свойства кристалла не только в возбужденном состоянии, но и в исходном состоянии. Впервые были обнаружены вибронные переходы очень большой интенсивности, которые соответствовали электронным переходам из возбуждённых состояний основного мультиплетта.

2. Если спектры поглощения и МКД переходов хорошо разрешены (как на рис. 1), то с помощью этих спектров можно найти значения зеемановских расщеплений  $\Delta\omega_0$ . Расщепление крамеровских дублетов в магнитном поле, направленном вдоль оси  $C_3$  кристалла, дается выражением  $\Delta E = \mu_B g_C H$ , где  $g_C$  является эффективным фактором Ланде в  $C_3$ -направлении. Таким образом, для переходов между крамеровскими дублетами  $2\hbar\Delta\omega_0 = \mu_B H \Delta g_C$ . Здесь  $\Delta g_C$  разница эффективных факторов Ланде  $g_C$  состояний, участвующих в переходе, которые таким образом и были найдены из эксперимента.

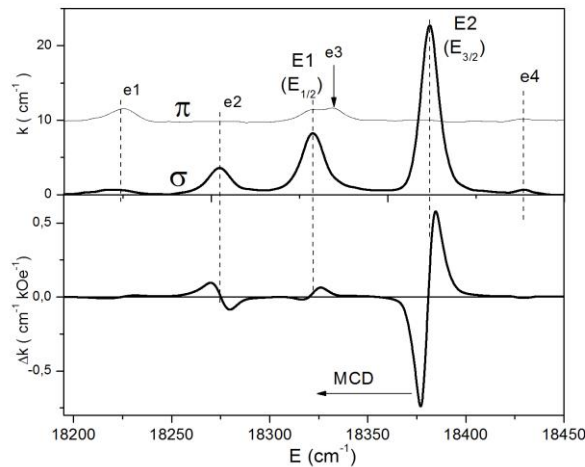


рис.1. Поглощение ( $k$ ), МКД ( $\Delta k$ ) спектра для перехода  $4I15/2 \rightarrow 4S3/2$  при 90 К.

В кристаллах с осевой симметрией электронные состояния можно характеризовать кристаллическим квантовым числом  $\mu$ . В тригональных кристаллах для состояний с полуцелым моментом  $J$  оно имеет значения:  $\mu = +1/2, -1/2, 3/2 (\pm 3/2)$ . Кроме того, в кристаллах с осевой симметрией электронные состояния могут быть описаны в первом приближении волновыми функциями  $|J, \pm M_J\rangle$  свободного атома. Между значениями  $\mu$  и  $M_J$  существует соответствие:

$$M_J = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \pm 7/2, \pm 9/2, \pm 11/2, \pm 13/2, \pm 15/2 \quad (1)$$

$$\mu = \pm 1/2, (\pm 3/2), \mp 1/2, \pm 1/2, (\pm 3/2), \mp 1/2, \pm 1/2, (\pm 3/2)$$

Соотношения (1) характеризуют Крамеровские дублеты в приближении функций  $|J, \pm M_J\rangle$ . Правила отбора для числа  $\mu$  аналогичны правилам отбора для числа  $M_J$  в свободных атомах. В частности, для электрического дипольного поглощения:

$$\Delta\mu = \pm 1 \text{ соответствует } \mp \text{ круговой поляризации и } \sigma\text{-поляризованным волнам} \quad (2)$$

Используя соотношения (1) и (2) были рассчитаны теоретические значения  $\Delta g_{CM}$  изменения фактора Ланде при электронных переходах. Результаты для перехода  $^4I_{15/2} \rightarrow ^4S_{3/2}$  показаны в таблице:

Мультиплет	Уровень	$E$ (см <sup>-1</sup> )	Поляр.	Возбужденное состояние	$M_J$	$\Delta g_{CM}$	$\Delta g_C$
$^4S_{3/2}$ (E)	E1	18322	$\pi, \sigma$	$E_{1/2}$	$\pm 1/2$	-17.6	
	E2	18382	$\sigma$	$E_{3/2}$	$\pm 3/2$	+9.6	+7.14
	e1	18224	$\pi, \sigma$	$E_{1/2}$		+11.2	+7.38
	e2	18274	$\sigma$	$E_{1/2}$		-16	-8.33

Хорошее согласие между теоретическими значениями  $\Delta g_{CM}$  в приближении функций  $|J, \pm M_J\rangle$  и экспериментальными  $\Delta g_C$  в полосе E и в некоторых других полосах показывает, что приближение теоретической функции  $|J, \pm M_J\rangle$  для переходов близка к реальности, несмотря на сильную легкоплоскостную анизотропию в основном состоянии. Еще раз мы наблюдаем разницу между свойствами кристалла в основном электронном состоянии и локальными свойствами кристалла под действием электронного перехода. Тем не менее, необходимо отметить, что расхождения между значениями  $\Delta g_{CM}$  и  $\Delta g_C$  имеют место. Это является следствием перемешивания функций  $|J, \pm M_J\rangle$  с различными  $M_J$ , но равными  $\mu$  (см. (1)) в кристаллическом поле.

### Влияние высокого давления на структуру кристаллов $C_{70}$

**Соколовский Дмитрий Николаевич**

*Лентяков Владимир Владимирович, Волкова Яна Юрьевна*

*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина*

*Бабушкин Алексей Николаевич, д.ф.-м.н.*

[sokolovskyd1@gmail.com](mailto:sokolovskyd1@gmail.com)

Электрические, механические и оптические свойства кристаллов фуллеренов демонстрируют широкие перспективы применения этих материалов в электротехнике и оптоэлектронике. Фуллерены в кристаллах характеризуются относительно невысокими энергиями связи, поэтому в фуллеритах уже при комнатной температуре наблюдаются фазовые переходы, приводящие к ориентационному разупорядочению. При высоких давлениях в кристаллах  $C_{60}$  и  $C_{70}$  наблюдается образование структур твердого углерода с ковалентными связями между атомами различных молекул фуллеренов, как это имеет место в алмазе [1]. Исследованиям этих структурных преобразований на сегодняшний день уделяется достаточно много внимания.

Целью работы было изучение структурных преобразований, происходящих в кристаллах фуллерена  $C_{70}$  при высоких давлениях. Кристаллы  $C_{70}$  были исследованы методами рентгеновской дифракции и *in situ* спектроскопии комбинационного рассеяния при давлениях до 32,8 ГПа. Эксперименты проводились с использованием камеры высокого давления конструкции Мерилла-Бассета. Образец помещался между алмазными наковальнями с диаметром кулет 250 мкм.

При атмосферном давлении  $C_{70}$  кристаллизуется в ГЦК структуру с параметром решетки  $a = 14,89$  Å. Когда давление достигает 14 ГПа, большинство дифракционных пиков становятся слишком слабыми для наблюдения. Вероятно, при давлении более 14 ГПа начинается процесс аморфизации кристаллов  $C_{70}$ .

На рисунке 1 показаны *in situ* КР спектры кристаллов  $C_{70}$ , полученные при комнатной температуре в диапазоне давлений от 5 до 32,8 ГПа. Участок вблизи  $\omega = 1332$  см<sup>-1</sup> был удален из спектров, т.к. в данной области преобладает сильное колебание, исходящее от алмазных наковален, и его вклад в спектр является доминирующим. При давлениях выше 14 ГПа большинство пиков становятся широкими или слишком слабыми для наблюдения, и только наиболее сильный, широкий пик около 1567 см<sup>-1</sup> может отчетливо наблюдаться. При более высоких давлениях до 32,8 ГПа, можно наблюдать только широкую полосу около 1680 см<sup>-1</sup>, что может быть связано с аморфизацией фуллеренов  $C_{70}$  под давлением [2]. В то же время, в области низких частот спектра, записанного при давлении 32,8 ГПа, присутствует характерный для фуллеренов пик с частотой около 410 см<sup>-1</sup> (рис. 1). Наличие данного пика, свидетельствует о том, что при давлении порядка 30 ГПа переход фуллеренов в аморфную фазу происходит не полностью. Данное наблюдение находится в хорошем соответствии с ранее проведенными исследованиями, согласно которым аморфная фаза фуллерена  $C_{70}$  является обратимой, как минимум при давлениях порядка 31,1 ГПа [3].